

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO

VIŠJE RAČUNSKE METODE

1. naloga: Schrödingerjeva enačba za en delec

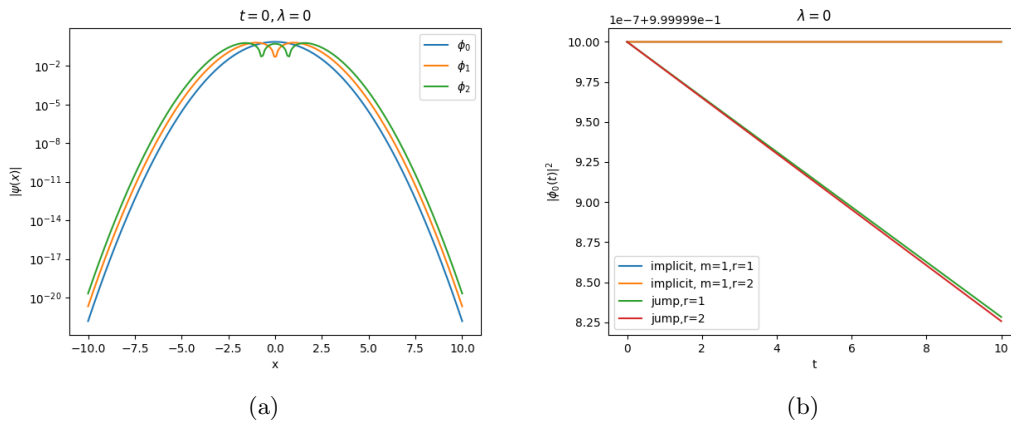
Žiga Šinigoj, 28222025

Ljubljana, februar 2023

1 Rezultati

V nalogi nas zanima časovni razvoj lastnega oziroma koherentnega stanja. ko vklopimo anharmonsko motnjo. Implementiral sem dve metodi, metodo skoka s končnim propagatorjem in implicitno metodo. Končne difference so precej nestabilne, zato se nisem ukvarjal z njimi. Implementiral sem krajevno aproksimacijo drugega odvoda do 7. reda (v navodilih sta implementirani 1. in 2.). Prav tako je mogoče obravnavati časovni odvod z aproksimacijo višjih redov s Padejevo aproksimacijo eksponentne funkcije v implicitni metodi (<https://doi.org/10.4153/CJM-1995-058-6>), to sem implementiral do 5. reda. Za velikost mreže sem vzel 200 točk v kraju na intervalu $x \in [-10, 10]$ s časovnim korakom $dt = 0.004$. Aproksimacija drugega odvoda v kraju da tridiagonalen Hamiltonian, višji redi pa več diagonalno matriko. Implicitni sistem sem reševal z metodo *scipy.linalg.solve_banded* v Pythonu.

Ker je verjetnostna gostota funkcije neničelna na celotni osi je potrebno vzeti dovolj veliko območje, da bo vrednost gostote oz. valovne funkcije zanemarljivo majhna. V ta namen sem pogledal lastne funkcije harmonskega oscilatorja (slika 1a), kjer vidim da je vrednost valovne funkcije zanemarljivo majhna že pri $|x| = 7$. Vseeno sem se odločil za zgoraj omenjeni interval. Metode zelo dobro ohranjajo verjetnostno gostoto, sprememba na danem časovnem intervalu se pozna na sedmi decimalki (slika 1b).

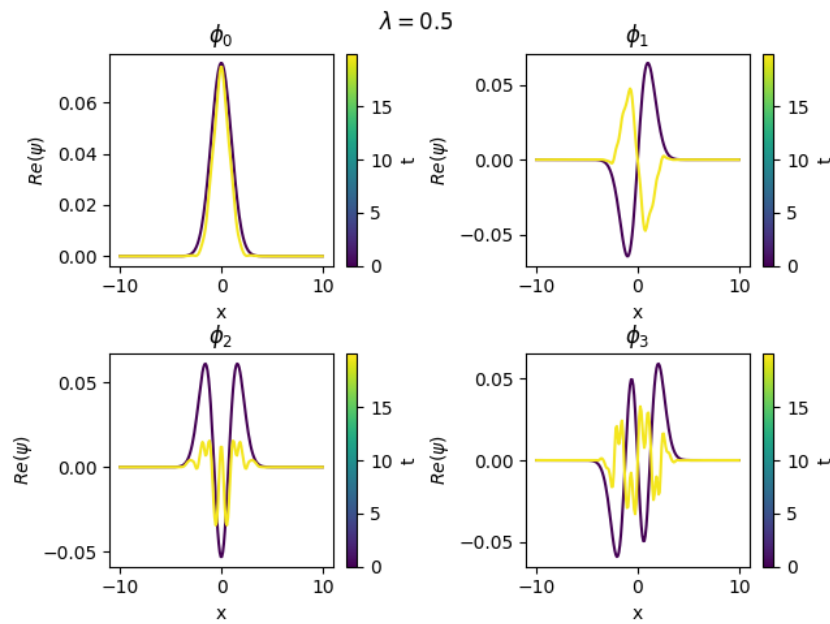
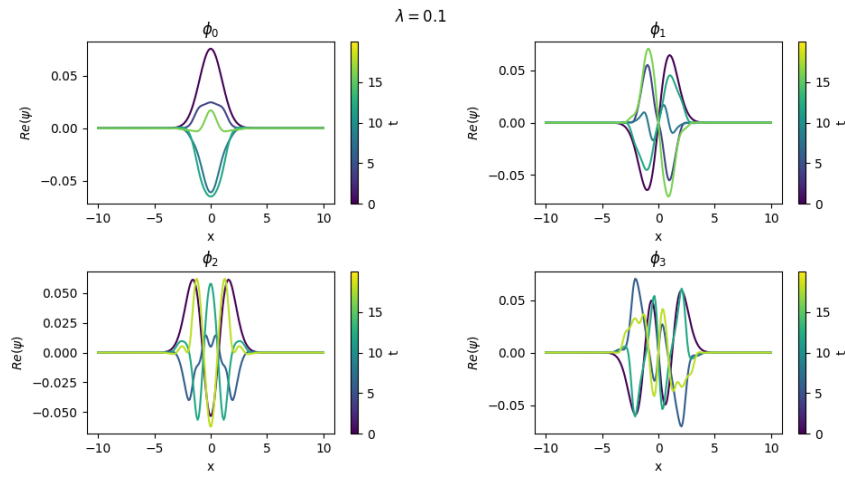
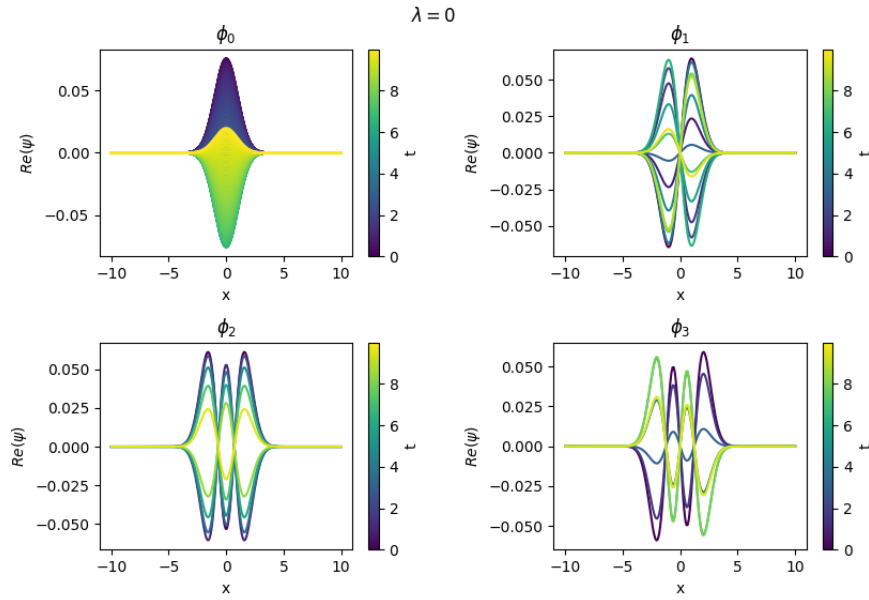


Slika 1: a) Prve tri lastne funkcije harmonskega oscilatorja (Φ_i) v logaritemski skali. b) Verjetnostna gostota lastne funkcije harmonskega oscilatorja v odvisnosti od časa. Indeksa m in r predstavlja aproksimacijo m-tega reda v času in r-tega reda v kraju, 'jump' oznaka se navezuje na metodo s končnim propagatorjem.

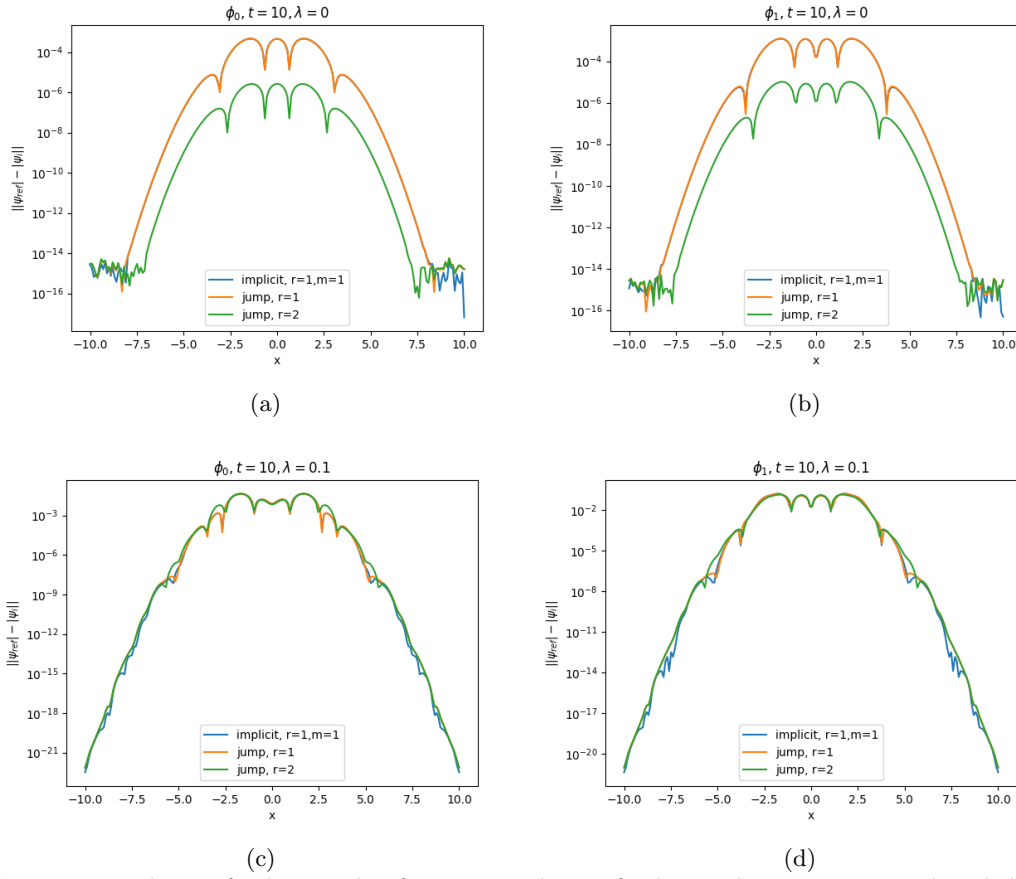
1.1 Časovni razvoj anharmonskega oscilatorja

Pri računanju časovnega razvoja sem uporabil implicitno metodo reda $m=2, r=3$, indeksa m in r predstavlja aproksimacijo m-tega reda v času in r-tega reda v kraju. Časovni razvoj valovne funkcije za različne vrednosti parametra λ prikazuje slika 2. Ker poznamo časovni razvoj lastnih funkcij harmonskega oscilatorja lahko preverimo če metoda deluje. Časovni razvoj poda 'stoječe valovanje' valovne funkcije. Ko vklopim parameter motnje pa se slika precej pokvari. Ker funkcije Φ_i niso več lastne funkcije Hamiltoniana, ampak je rešitev neka linearna kombinacija lastnih funkcij. Valovni paket izgubi obliko lastnih funkcij harmonskega oscilatorja. Ob večanju parametra motnje λ se večajo vrednosti koeficientov višje energijskih lastnih funkcij harmonskega oscilatorja in dobim bolj oscilirajoče stanje.

Da preverim delovanje metode s končnim propagatorjem in natančnosti metod sem pogledal odstopanje valovne funkcije ob času t od referenčne valovne funkcije. Za referenčno rešitev sem vzel rešitev, ki jo da implicitna shema reda $m=4, r=4$. Odstopanja prikazuje slika 3. Čeprav se zdi na videz, da so precejšnja odstopanja, če primerjam z valovnimi funkcijami zgoraj, to ni res. Te rešitve niso normalizirane, zato je smiselno primerjati samo odstopanja metod med seboj. Ob vklopu motnje se odstopanja malo povečajo, sploh pri drugi lastni funkciji Φ_1 .



Slika 2: Časovni razvoj lastnih funkcij pri različnih vrednostih parametra motnje.



Slika 3: Odstopanja valovne funkcije od referenčne valovne funkcije ob času t pri različnih lastnih funkcijah in vrednostih parametra motnje. Pri računanju odstopanj za $\lambda = 0.1$ sem moral pomanjšati časovni korak za $1/4$, saj je metoda s končnim korakom divergirala v nasprotnem primeru (ne glede na red r v kraju).

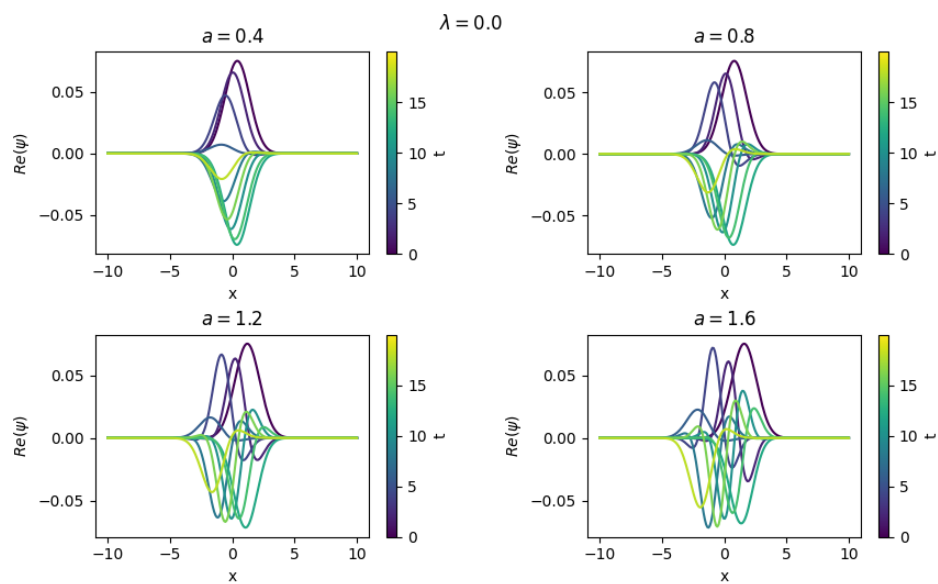
1.2 Časovni razvoj koherentnega stanja

Zanimivo je pogledati obnašanje valovne funkcije (koherentnega stanja), če je začetna lega izmaknjena iz ravnovesne lege. Za računanje časovnega razvoja sem uporabil implicitno metodo reda $m=2$, $r=3$. Ob odsotnosti motnje rešitev poznamo, gibanje je analogno gibanju kroglice v kvadratičnem potencialu, če gledam samo težišče valovne funkcije. Časovni razvoj pri različnih začetnih legah $\Phi_0(x - a)$. Časovni razvoj pri različnih vrednostih odmika a in parametra λ prikazuje slika 4. Z večanjem začetnega odmika a se pri neničelni vrednosti parametra motnje bolj valovi valovna funkcija, saj je večji vpliv anharmonskega prispevka potenciala, ki gre kot x^4 .

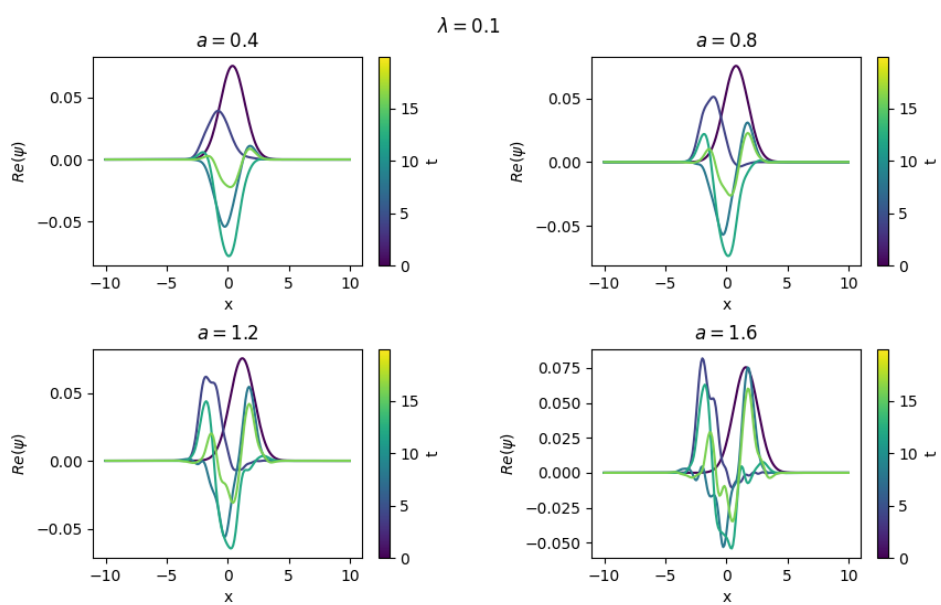
Časovni potek koherentnega stanja pri različnih vrednostih motnje prikazuje slika 5. Za majhne vrednosti motnje je gibanje približno enako kot brez motnje. Z večanjem vrednosti motnje pa se lastno stanje spremeni v linearno kombinacijo lastnih stanj.

1.3 Zaključek

Metoda s končnim propagatorjem dobro opiše časovni razvoj harmonskega oscilatorja, pri anharmonskega oscilatorju je precej slabša od implicitne metode, ki je stabilna povsod. Z večjimi redi m in r lahko dosežem več velikostnih redov večjo natančnost kot osnovna implicitna metoda $m=1, r=1$.

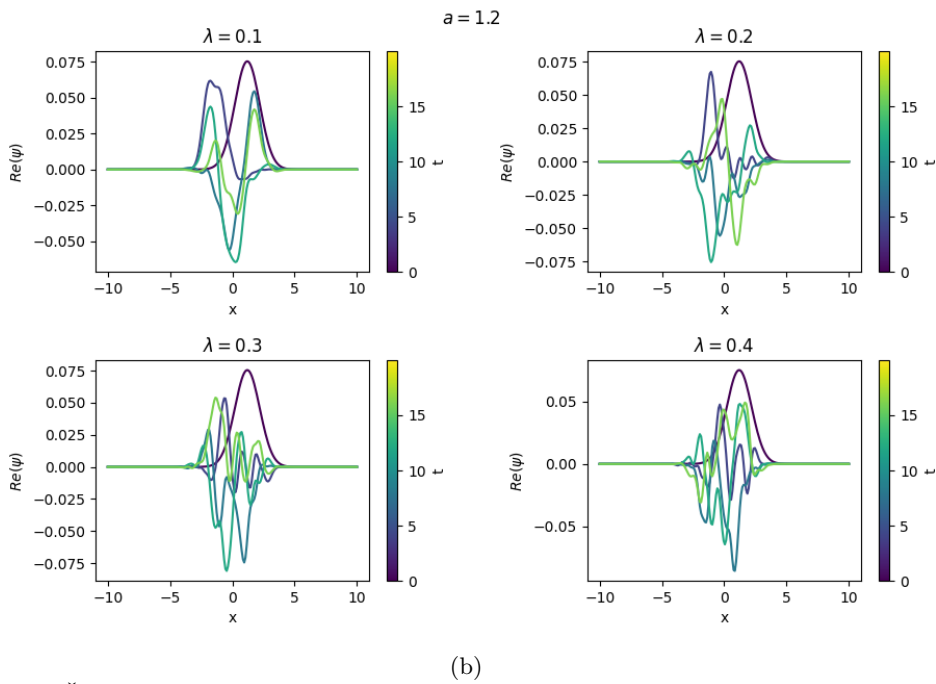
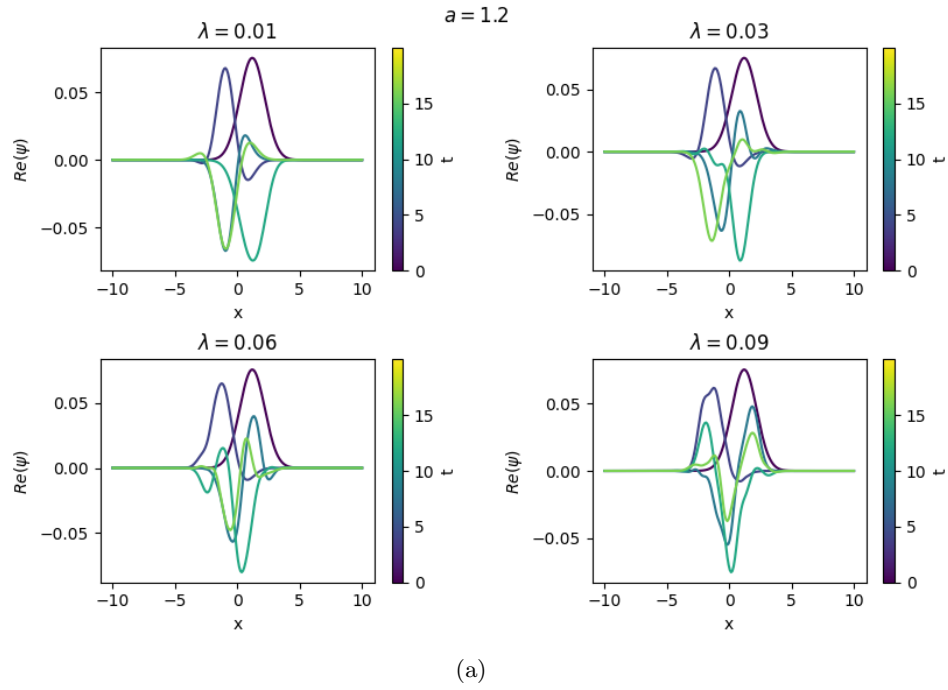


(a)



(b)

Slika 4: Časovni razvoj koherentnega stanja pri različnih začetnih legah in parametru λ .



Slika 5: Časovni razvoj koherentnega stanja pri različnih vrednostih parametra λ .